シミュレーション技術の育成と実践

物質工学科　　吉村　忠与志、佐々　和洋

1.　はじめに

コンピュータ支援工学(CAE)において設計、製造や工程管理の事前検討を行う場合、問題解決のために工学シミュレーションを実施する。そのとき、解決したい問題点を整理し、関連するパラメータを準備し、数学的モデルを構築して、模擬実験を行う。現実の現象をモデル化する場合、連続変化モデルか離散変化モデルかの 2 通りの数学的モデルを構築する。そして、そのモデルによるシミュレーションを実施してその結果と現実の結果を対照することによってその現象の詳細を推定。分析することができる。まとめると、図 1 のようになる。

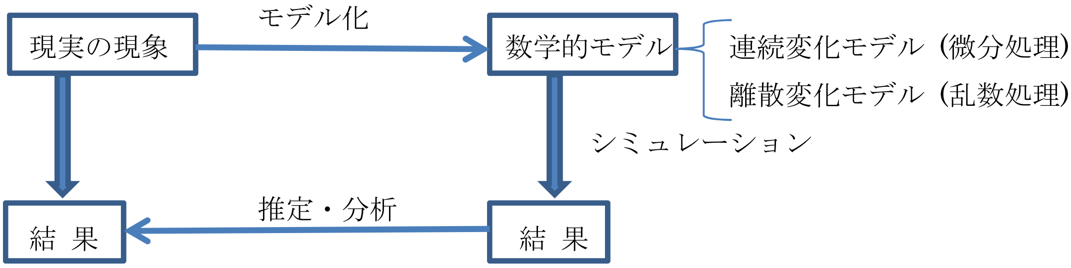


図 1　シミュレーションのモデル化

シミュレーションを行う上で最も有効なプラットフォームが Excel である [1]。Excel を用いて行う CAE の作業としての流れは下記のようになる。

① 目標とする現実の現象を予測して解析内容を決定する
② 解析条件をまとめて情報・データを収集する
③ 目標とするプロトタイプ(モデル式)における解析用データをシートに設定する
④ Excel/VBA でプログラミングしてシミュレーションする
⑤ 解析結果を分析・推定する

今回、高専物質工学科 4 年「情報化学」においてシミュレーション技術の育成を目的に教育実践を行った。図 2 に授業風景を示す。教育実践はシミュレーションの理論を座学で行い、演習はコンピュータ室で Excel/VBA により行った。

本報での問題解決の演習は例題中心で行い、連続変化問題として、一次元非定常伝熱と煤煙の拡散を挙げ、離散変化問題として、大数の法則とブラウン運動を挙げて、シミュレーション技術の育成を図った。

図 2　シミュレーション教育の座学風景

2.　連続変化モデル

いろいろな自然現象は、時間や長さなどにおける連続変化であることが多く、その数式モデルは微分方程式で表現できる。そのモデル式において解析解が求められれば問題なく解くことができるが、解析解がなく数値解析を必要とする場合がある。

独立する変数が 1 つの場合常微分方程式を解くことになる。その変数が 2 つ以上になると、偏微分方程式を解くことになる。

例題 1　一次元非定常伝熱問題

ある温度に熱した平板を水槽に投入して冷却した場合の平板内の温度分布をシミュレーションしなさい。ただし、平板の表面温度は水槽温度で一定とし、平板材質の比熱 Cp、密度 ρ、熱伝導率 κ は提示するものとする。

この例題の数学的モデルは、次の偏微分方程式で与えられる。

$$\frac{\partial T}{\partial \theta} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

ただし、$\alpha = {}^{\kappa}/_{\rho \cdot Cp}$であり、x 点における瞬時の温度を T とし、時間を θ とする。この基本式は、Dusinberre の数値解析法により差分化して次の近似式で示される。

$$T'_n = \frac{T_{n-1} + (m-2)T_n + T_{n+1}}{m}$$

ただし、モジュラス$\mathrm{m} = {}^{\Delta x^2}/_{\alpha \cdot \Delta\theta}$である。

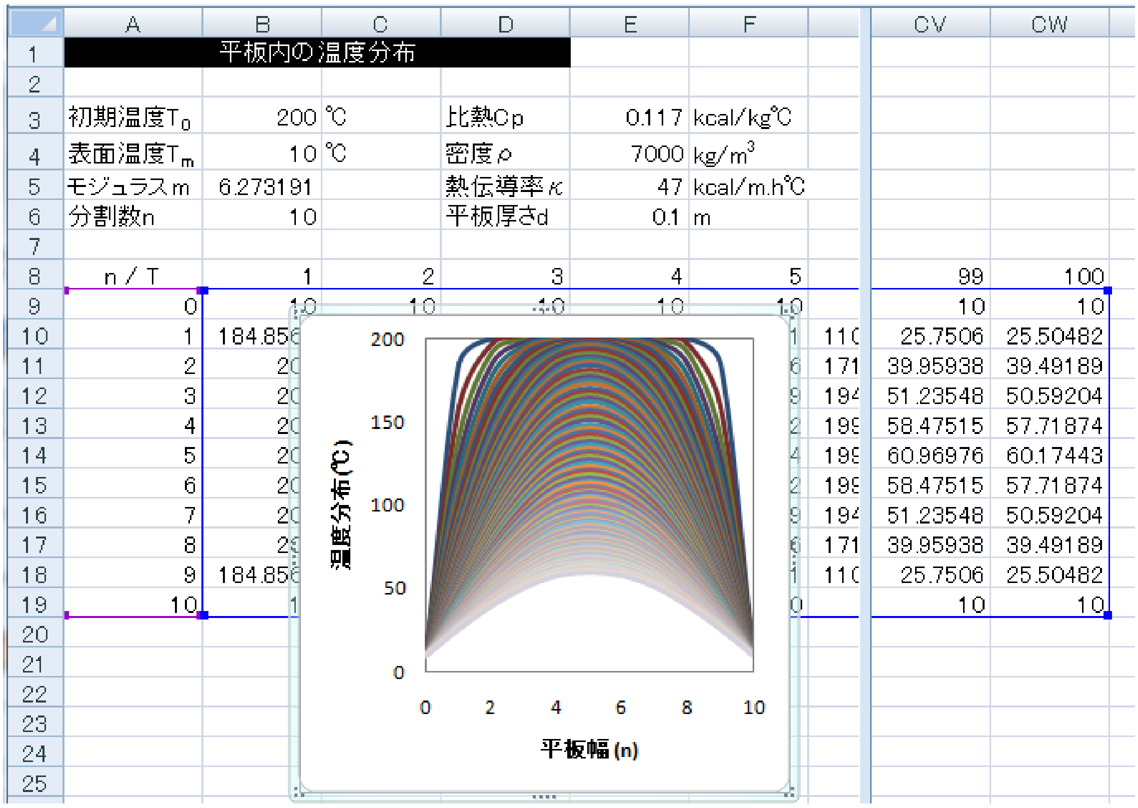


図 3　熱伝導率 47kcal/m.h℃の場合の温度分布結果

近似解を示す差分式による数値解析をマクロでプログラミングする。本報では紙面の都合ですべての例題のマクロコードを省略する。興味のある方には公開する。図3のシートに平板材質の比熱Cp、密度ρ、熱伝導率κを提示して実行した。提示の実験条件の場合、200℃に熱せられた平板を10℃の水槽に投入したので、平板の表面温度は10℃と一定で、図4のような等高線図で温度分布を立体視することができる。

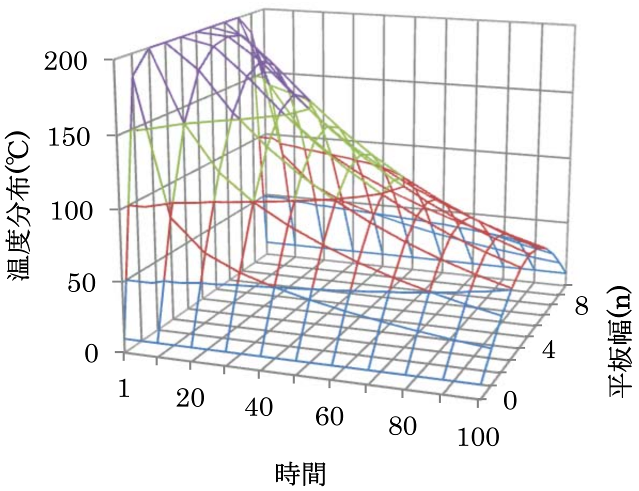


図4　等高線図による温度分布図

例題2　煤煙の大気拡散問題

大気中に汚染物質(煤煙)が煙突から拡散する様子をシミュレーションしなさい。ただし、各条件・パラメータについては提示するものとする。

煙突からの物質の拡散は 3 次元現象であるが、発生場所からの距離x(km)のみについて考えれば、物質の移動速度で表すことができる。

$$J_x = D_x \frac{\partial C}{\partial x}$$

物質の拡散係数 D_x は物質で決まる物性値である。汚染物質の濃度の推定法には、ボサンケ(Bosanquet)の式が提案されている。有効煙突高の定義は、図5のようである。

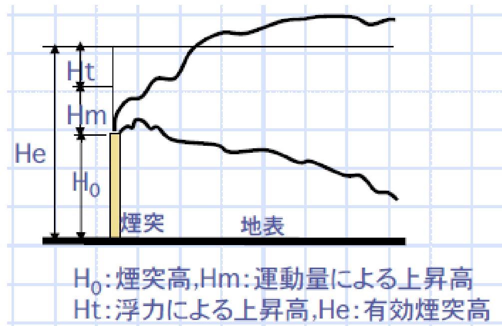


図5　有効煙突高度の定義

$$H_e = H_0 + 0.65(H_m + H_t)$$

$$H_m = \frac{4.77}{1 + \frac{0.43U}{v_g}} \cdot \frac{\sqrt{Q_{v1} v_g}}{U}$$

$$H_t = 6.37g \frac{Q_{v1} \Delta T}{U^3 T_1} \left(\log_e J^2 + \frac{2}{J} - 2 \right)$$

$$J = \frac{U^2}{\sqrt{Q_{v1} v_g}} \left(0.43 \sqrt{\frac{T_1}{g\left(d\theta/_{dz}\right)}} - 0.28 \frac{v_g}{g} \cdot \frac{T_1}{\Delta T} \right) + 1$$

ただし、H_0:煙突高(m)、U:風速(m/s)、v_g:吐出速度(m/s)、Q_{v1}:T_1 における排ガス量(m^3/s)、T_1:大気温度(K)、ΔT:排ガス温度差(K)、g:重力加速度 9.81(m/s^2)、$d\theta/dz$:大気の温位勾配 0.0033(K/m)である。

煤煙の拡散式はサットン(Sutton)によって、拡散幅を風下距離 x の関数として次式で与えられている。

$$C(x) = \frac{2Q}{\pi C_y C_z U x^{2-n}} \exp\left(-\frac{H_e^2}{C_z^2 x^{2-n}}\right)$$

ただし、サットンの大気乱れ係数 C_y、C_z、n は実験によって表のように決められ、煙の状態の大気安定度を表している。

表 1　サットンの大気乱れ係数 [2)]

大気の安定状態	n	C_y	C_z
強いてい減（ループ型(蛇行、不安定)）	0.20	0.37	0.21
中位（錐型(釣鐘、弱不安定)）	0.25	0.21	0.12
中位の逆転（扇形(強安定)）	0.33	0.21	0.074
強い逆転（いぶし型(上層安定、下層不安定)）	0.50	0.080	0.047

煤煙の最大着地濃度 C_{max} とその風下距離 x_{max} は次式で与えられる。

$$C_{max} = \frac{2Q}{\pi e U H_e^2}\left(\frac{C_z}{C_y}\right)$$

$$x_{max} = \left(\frac{H_e}{C_z}\right)^{\frac{2}{2-n}}$$

以上の条件式をワークシートおよびマクロコードに設定し、煤煙の拡散シミュレーションを行ったのが図 6 である。有効煙突高さ H_e を大きくすると、最大着地濃度 C_{max} を小さくすることができ、その風下距離 x_{max} は大きくなる。

	A	B	C	D	E	F	G
1	煤煙の拡散シミュレーション						
2							
3	U =	22	m/s		7000	0.0191466	大気条件: 錐型(釣鐘、弱不安定)
4	H_0 =	20	m		x (m)	C	
5	v_g =	5	m/s		50	3.146E-16	
6	Q =	2	m^3/s		100	0.0001988	
7	L =	0.5	m		150	0.04371	
8	T_1 =	25	℃		200	0.2733215	
9	T_2 =	200	℃		250	0.5866346	
10	n =	0.25			300	0.824984	
11	Q_{v1} =	0.6	m^3/s		350	0.954152	
12	H_e =	20.1	m		400	0.998816	
13	H_m =	0.1	m		450	0.9904596	
14	H_t =	0.0	m		500	0.9526345	
15	J =	11290.4			550	0.9003577	
16	C_{max} =	2.22E-05	ppm		600	0.8425181	
17	x_{max} =	413.9	km		650	0.7841207	
18	e =	2.72			700	0.7278375	
19	dT/dz =	0.0033	K/m		750	0.6749787	
20	n	Cy	Cz		800	0.6260763	
21	0.2	0.37	0.21	ループ型(	850	0.5812294	
22	0.25	0.21	0.12	錐型(釣鐘	900	0.5403051	
23	0.33	0.21	0.074	扇形(強安	950	0.5030554	
24	0.5	0.08	0.047	いぶし型(	1000	0.4691834	

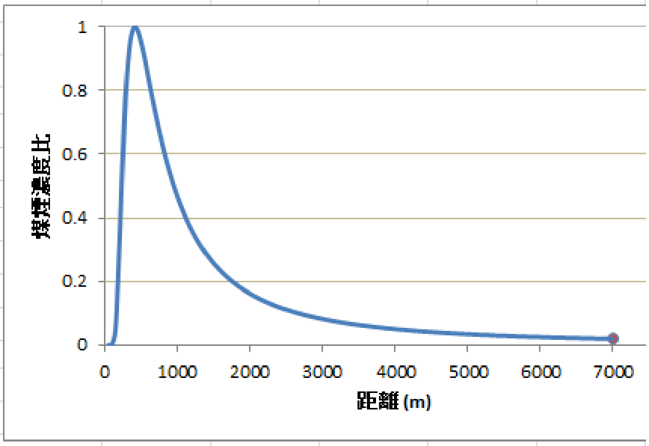


図 6　大気条件 n = 0.25 の場合

3.　離散変化モデル

離散変化するモデルにおいては、完全なサイコロを振ってあらゆる条件を網羅するためには一様な乱数のもとでシミュレーションを実施する。でたらめで一様な数を乱数といい、どの数も等しい確率で不規則になる数である。このように乱数によるシミュレーションをモンテカルロ法という。Excel には乱数発生関数 RAND()が用意されており、その発生条件は次の 4 つが考えられ、乱数発生の機構はすべて満足しており、利用できる。

① 乱数の発生モードが速い
② 出現する周期が長い
③ シミュレーションに必要な再現性がある
④ 統計的検定に耐える一様なランダム性がある

例題 3　大数法則問題

正方形に接する半径 1 の 1/4 円を描き、1/4 円内にヒットする数により、その部分の面積からπを求めなさい。

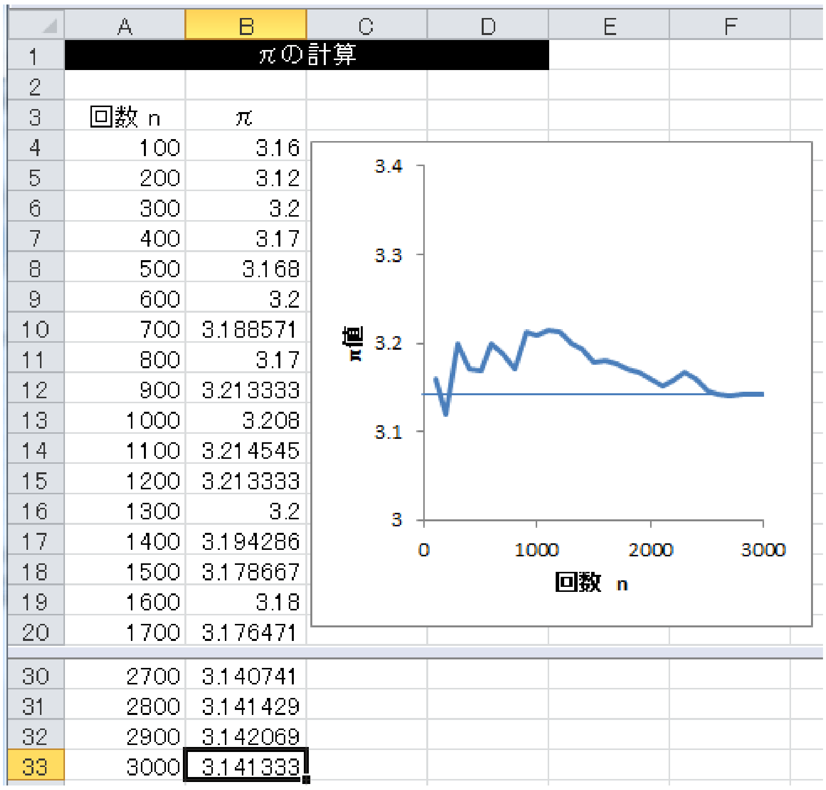
1/4 円内は $f(x,y) = x^2 + y^2 < 1$ の関係である。その中にヒットする数による部分面積は次式より求められる。

$$S = \iint_0^1 f(x,y)dxdy \cong \frac{hit}{n}$$

この面積値はπ/4 に漸近することを例題で確認する。

まず乱数を発生させて点(x, y)を算出してその点が 1/4 円内にヒットしたときのヒット数をカウントして繰り返しを 100 から 3000 回とするプログラムをマクロでコードする。その計算結果を図 7 に示す。繰り返し回数が増えるほどπ(3.1415926)値に漸近している。

乱数の発生はワーク関数では RAND()を用いるが、マクロコードでは Rnd を用いるときは乱数発生を初期化するために Randmize を用いることが必要である。



	A	B
1	πの計算	
2		
3	回数 n	π
4	100	3.16
5	200	3.12
6	300	3.2
7	400	3.17
8	500	3.168
9	600	3.2
10	700	3.188571
11	800	3.17
12	900	3.213333
13	1000	3.208
14	1100	3.214545
15	1200	3.213333
16	1300	3.2
17	1400	3.194286
18	1500	3.178667
19	1600	3.18
20	1700	3.176471
30	2700	3.140741
31	2800	3.141429
32	2900	3.142069
33	3000	3.141333

図 7　πの計算結果

例題 4　ブラウン運動問題

ブラウン運動という 2 次元ランダムウォークをシミュレーションしなさい。ただし、繰り返し回数は 100 回とする。

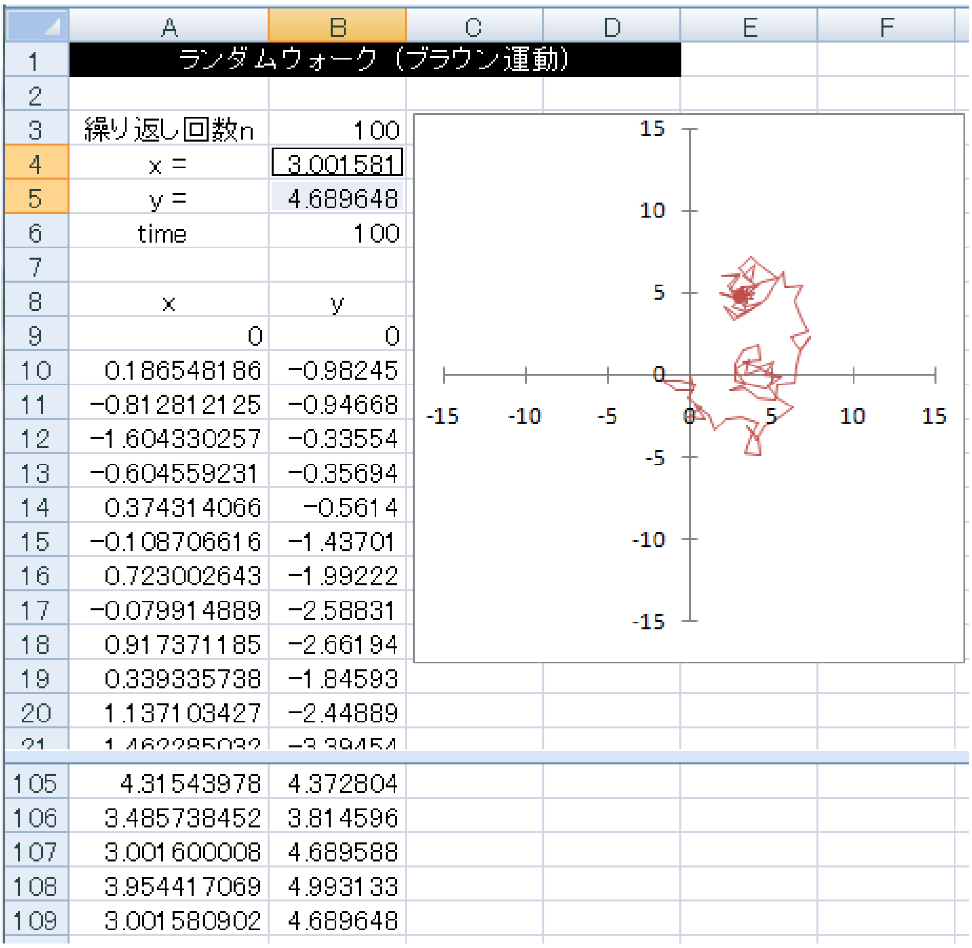
2 次元のランダムウォークとして、まず始点は原点(0, 0)として出発する。0 から 2πまでの乱数を発生させて座標(x, y)

を計算し、一歩ずつ進ませる。データ設定を示し、ブラウン運動をシミュレーションしたのが図８である。

ブラウン(Brown)は水面に浮かんでいる花粉が不規則に微かに動き回る現象を発見し、ブラウン運動と名付けた。酒飲みの酔っ払いが千鳥足で歩き回る様子に似ているので酔歩、ランダムウォークともいう。これを再現するために乱数を用いる。

計算するだけだと瞬時に出力されてしまうので、ランダムウォークを視覚化するために表示の遅延機能を付加するとよい。さらに、視覚化するうえで、図８のセル”B4, B5” を 活 性 表 現 す る た め に Range(“B4, B5”).Activate を用いる必要がある。

シミュレーション技術の育成において、学生実習を行う上で、計算結果を視覚化することは重要である。その点、Excel/VBA をシミュレーションのプラットフォームにすることは有意義である。



	A	B
1	ランダムウォーク（ブラウン運動）	
2		
3	繰り返し回数n	100
4	x =	3.001581
5	y =	4.689648
6	time	100
7		
8	x	y
9	0	0
10	0.186548186	−0.98245
11	−0.812812125	−0.94668
12	−1.604330257	−0.33554
13	−0.604559231	−0.35694
14	0.374314066	−0.5614
15	−0.108706616	−1.43701
16	0.723002643	−1.99222
17	−0.079914889	−2.58831
18	0.917371185	−2.66194
19	0.339335738	−1.84593
20	1.137103427	−2.44889
105	4.31543978	4.372804
106	3.485738452	3.814596
107	3.001600008	4.689588
108	3.954417069	4.993133
109	3.001580902	4.689648

図８　ブラウン運動のシミュレーション

引用文献

1)　吉村忠与志、Excel を用いる CAE 教育の実践と今後の課題、耐火物、vol.62(9),pp.449-457(2010)

2)　Sutton, O.G, Micrometeorology(微気象学), McGraw-Hill(1953), p.333.

3)　吉村忠与志、木田稔、大気中における煤煙の拡散シミュレーション、会報 JAPC, vol.1, pp.35-50(1982)

4)　吉村忠与志、佐々和洋他名、Excel で数値計算の解法がわかる本、秀和システム(2009), p.280.